Technická univerzita v Liberci

FAKULTA PŘÍRODOVĚDNĚ-HUMANITNÍ A PEDAGOGICKÁ

Katedra: Matematiky a didaktiky matematiky

Studijní program: Učitelství pro 2. Stupeň ZŠ

Studijní obor: (kombinace) Matematika – Informatika

SOUSTAVY LINEÁRNÍCH ALGEBRAICKÝCH ROVNIC

SYSTEMS OF LINEAR ALGEBRAIC EQUATIONS

Diplomová práce: DP – 11 – FP – KMD – 002

Autor: **Podpis:**

Ivana Hušková

Adresa:

Polní 353/21

460 01, Liberec XII

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Jaroslav Mlýnek, CSc.

Počet

stran	slov	grafů	tabulek	pramenů	příloh
77	8 207	1	9	6	1

V Liberci dne: 8. 12. 2010

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
FAKULTA PŘÍRODOVĚDNĚ-HUMANITNÍ A PEDAGOGICKÁ

Katedra matematiky a didaktiky matematiky

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(pro magisterský studijní program)

pro (diplomant):	Hušková Ivana
adresa:	Havlíčkova 22, 551 01 Jaroměř
studijní obor (kombinace):	Matematika - Informatika pro ZŠ
Název DP:	**Soustavy lineárních algebraických rovnic**
Název DP v angličtině:	Systems of linear algebraic equations
Vedoucí práce:	doc. RNDr. Jaroslav Mlýnek, CSc.
Konzultant:	
Termín odevzdání:	květen 2010

Poznámka: Podmínky pro zadání práce jsou k nahlédnutí na katedrách. Katedry rovněž formulují podrobnosti zadání. Zásady pro zpracování DP jsou k dispozici ve dvou verzích (stručné, resp. metodické pokyny) na katedrách a na Děkanátě Fakulty přírodovědně-humanitní a pedagogické TU v Liberci.

V Liberci dne 28. 4. 2009

děkan

vedoucí katedry

Převzal (diplomant): ____________________

Datum: ____________________ Podpis: ____________________

Název DP:	SOUSTAVY LINEÁRNÍCH ALGEBRAICKÝCH ROVNIC
Vedoucí práce:	doc. RNDr. Jaroslav Mlýnek, CSc.
Cíl:	Práce je zaměřena na problematiku řešení soustav lineárních algebraických rovnic v reálném oboru. Diplomant zpracuje přehled podmínek řešitelnosti soustav a popíše principy přímých a iteračních metod řešení soustav se čtvercovou maticí soustavy, provede porovnání výhod a nevýhod jejich použití. Součástí práce bude i uvedení jednodušších soustav a postupů jejich řešení metodami užívanými na základní a střední škole. Diplomant se zaměří na praktické použití metody konjugovaných gradientů při řešení soustav s řídkou a pásovou maticí soustavy.
Požadavky:	Základní znalost lineární algebry, přehled o používaných metodách řešení soustav, schopnost formulace a řešení problému, přehled o probíraném učivu řešení soustav na ZŠ a SŠ.
Metody:	Studium příslušné literatury, naprogramování výpočtu řešení, provedení praktických výpočtů.
Literatura:	Nagy, J., Taufer, J.: Algebra. Vydavatelství ČVUT, 1997. Polák, J.: Přehled středoškolské matematiky. Prometheus, 1991. Ralston, A.: Základy numerické matematiky. Academia, Praha, 1978. Vitásek, E.: Numerické metody. SNTL, Praha, 1987. Odborné články v časopisech, Internet.

Prohlášení

Byla jsem seznámena s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědoma povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracovala samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce.

V Liberci dne: 8. 12. 2010

Ivana Hušková

Poděkování:

Chtěla bych touto cestou velice poděkovat panu doc. RNDr. Jaroslavu Mlýnkovi, CSc. za metodické vedení, za mnoho cenných rad a připomínek, ale hlavně za jeho vstřícný přístup a pomoc při zpracování diplomové práce. Dále bych poděkovala své rodině za podporu po celou dobu studia.

Anotace

Předkládaná práce je zaměřena na problematiku řešení soustav lineárních algebraických rovnic. V práci jsou uvedeny historické důvody vedoucí k řešení dané problematiky. Postupně podáváme základní přehled přímých a iteračních metod řešení soustav lineárních algebraických rovnic, jsou uvedeny přednosti jednotlivých metod. Ucelený přehled metod řešení soustav umožní studentům snadnější orientaci v dané problematice. Ve zbývající části práce se podrobněji zabýváme metodou sdružených gradientů, jsou popsány základní vlastnosti metody a vlastní algoritmus byl naprogramován v jazyce Matlab. Současně bylo provedeno několik numerických experimentů, při nichž byla využita naprogramovaná metoda sdružených gradientů. Uvedená metoda byla použita při numerickém řešení obyčejné diferenciální rovnice druhého řádu.

Abstract

This work is focused on solving systems of linear algebraic equations. The work is of historical reasons for addressing this issue. A basic overview of direct and iterative methods for solving systems of linear algebraic equations is given along with advantages of each method. A comprehensive overview of methods for solving systems allow students to easily grasp the issues. The remainder of the work discusses in more detail the conjugate gradient method and describes the basic properties and methods of its own algorithm programmed in Matlab language. Several numerical experiments were also carried out, using programmed conjugate gradient method. This method was used for the numerical solution of ordinary differential equations.

Zusammenfassung

Die vorgelegene Arbeit konzentriert sich auf die Problematik der Lösungen von linearen algebraischen Gleichungssystemen. In der Arbeit sind historische Gründe, die zur Lösung dieser Problematik führen, angebracht. Dabei wird schrittweise die Grundübersicht der direkten und interativen Lösungsmethoden der linearen algebraischen Gleichungssysteme dargestellt. Eine komplexe Übersicht der Systemelösungsmehtoden ermöglicht den Schülern eine einfachere Orientierung bei der Problematik. Im restlichen Teil der Arbeit befassen wir uns detailierter mit Mischgradienten, es sind hier Haupteigenschaften der Methoden beschrieben und das eigene Algorythmus wurde in der Sprache Matlab programmiert. Parallel wurden einige nummerische Experimente durchgeführt, bei denen die programmierte Methode der Mischgradienten angewandt wurde. Die angeführte Methode wurde bei nummerischer Lösung von ordinären Differenzialgleichungen der zweiten Reihe angewandt.

Obsah:

1. SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ

a, b, x, y, z, ξ	Vektory
A, B, C	Matice
$h(A)$	Hodnost matice A
x^T, A^T	Transponovaný vektor k vektoru x, transponovaná matice k matici A
r, c, α, β	Skalár
u	Vlastní charakteristický vektor matice
λ	Vlastní charakteristické číslo matice
$s(A)$	Spektrum A
$\varrho(A)$	Spektrální poloměr A
$\Vert . \Vert$	Norma
$\Vert A \Vert_E$	Euklidovská norma A
$\Vert x \Vert_A$	Energetická norma
$\Vert A \Vert_\infty$	Norma matice A
$K(A)$	Spektrální číslo podmíněnosti
ReA	Matice reálných složek prvků komplexní matice A
ImA	Matice imaginárních složek prvků komplexní matice A
$D, \det A$	Determinant A
a_{nm}	Prvek matice umístěna v *n-tým* řádku a *m-tým* sloupci

L	Dolní trojúhelníková matice
U	Horní trojúhelníková matice
A^{-1}	Inverzní matice k matici A
$\{ x_k\}$	Posloupnost
F	Iterační lineární funkce
R	Reálný obor
C	Obor komplexních čísel

2. Seznam použitých zkratek

SLAR	Soustava lineárních algebraických rovnic
GEM	Gaussova eliminační metoda
MSG	Metoda sdružených gradientů

3. ÚVOD

V diplomové práci se zaměříme na problematiku řešení lineárních algebraických rovnic.

V úvodní kapitole zdůrazňujeme prvopočáteční potřebu zařadit do matematiky něco na tehdejší dobu nového a přesto tak potřebného jako jsou lineární algebraické rovnice. Co bylo důvodem zaměření se na danou problematiku a jaký byl přístup k jejímu řešení? K tomu je nutné se zmínit o možnostech řešení, která se mohla v tehdejší době využívat.

Z historického hlediska mezi nejstarší záznamy, ve kterých nalezneme řešení jednodušších soustav lineárních rovnic, stojí za zmínku skupiny klínopisných textů. Vznikly ve starobabylónské říši za vlády Chamurappiho v letech 1792 – 1750 př. n. l. Z nich se dovídáme, že Babyloňané v této době znali řešení nejen lineárních, ale i kvadratických rovnic na rozdíl od Egypťanů, kteří znali pouze rovnice lineární. Babyloňané se zaměřili i na řešení lineárních rovnic o dvou neznámých. Postupem času byli nuceni řešit kubické a dokonce i bikvadratické rovnice.

Metody řešení formulovali pouze s určitými číselnými hodnotami koeficientů, čímž potvrzovali obecně platné znalosti při řešení příkladů.

Nutnost řešení těchto rovnic vznikla na základě potřeb řadových obyvatel. Pro snadnější představu se jednalo například o zjištění výšky stromu, rozdělení polí nebo majetku, propočty zásob obilí a zjištění množství úrody.

Pro názornost uveďme příklad z hliněné destičky pocházející z tehdejší doby:

„Plocha A vytvořená součtem dvou čtverců je rovna 1000. Strana jednoho čtverce je rovna dvěma třetinám strany druhého zmenšena o 10. Jak jsou veliké strany čtverce?“

Tento příklad vede k řešení soustavy rovnic:

$$x^2 + y^2 = 1000$$

$$\frac{2x}{3} - y = 10$$

Řešení této soustavy rovnic bude kladné číslo, a tomu odpovídá $x = 30$ a $y = 10$.

V hliněných destičkách je postup řešení omezen pouze na vyjmenování číselných operací. *„Zdvojmocni deset, to dá 100; odečti 100 od 1000, to dá 900“* atd.

U dalších příkladů, které se dochovaly na hliněných destičkách, jsou uvedena zadání úloh a někdy i výsledky. Proto se historikové domnívají, že úlohy byly řešeny jednak postupnou eliminací neznámých, jednak substitucí anebo metodou chybného předpokladu. Již zmiňovanou metodu chybného předpokladu nazval Leonardo Fibonacci *„regula versa“*. Tato metoda byla užívána již ve starém Egyptě ve 2. tisíciletí před Kristem.

Teprve v pozdější době se historikové začali více zajímat o studium staročínské matematiky. Za doby vlády dynastie Chan roku 206 – 25 před n. l. byla z pramenů, které pocházely již z 1. tisíciletí před n. l., sjednocena sbírka 246 úloh. Úlohy byly sestaveny i s odpověďmi a návody k řešení. Tato sbírka se jmenovala „Matematika v devíti knihách“. Jednotlivé knihy mají názvy podle obsahu např.: „Vyměřování polí“, „Poměry mezi různými druhy obilnin“, „Odměřování práce“ apod. Mezi těmito čistě kupeckými počty obsahují svazky knih také algoritmus řešení systému lineárních rovnic s libovolným počtem neznámých. Typickým příkladem je tato soustava:

$$x + 2y + 3z = 26$$

$$2x + 3y + z = 34$$

$$3x + 2y + z = 39$$

Rovnice jsou zde určeny *„maticí“* svých koeficientů sestavenou na počítací desce. Prvkem zmíněné matice může být i záporné číslo.

Sbírka „Matematika v devíti knihách“ byla po dlouhá staletí pramenem matematických znalostí v Číně.

Metodami řešení soustav se zabýval také Leonardo Fibonacci například ve svém spisu Flos.

V této době se téměř na všechny objevy a vynálezy přišlo prakticky náhodou. Tehdejší matematikové a objevitelé si ani neuvědomovali možnosti, jak lze jejich objev postupem doby využít.

Cílem bylo usnadňovat tak lidem práci a jejich každodenní život. Zároveň nám zanechali odkaz, díky kterému si dovedeme představit kvalitu jejich života, kultury i vzdělání. O tom všem, o dalších důležitých faktech i z jiných oblastí matematiky, pojednává velice obsáhle kniha [2].

V následující kapitole se podrobněji seznámíme se základními známými poznatky o soustavách lineárních algebraických rovnic. Obecně známé definice a věty jsou uvedeny v [1].

Pátá kapitola je zaměřena na metody řešení soustav lineárních algebraických rovnic se čtvercovou regulární maticí soustavy. Kapitola je rozdělena do tří částí – přímé metody, iterační metody a iterační metody řešení založené na minimalizaci kvadratického funkcionálu.

V šesté kapitole jsou uvedeny výstupy numerických experimentů při řešení soustav lineárních algebraických rovnic využitím metody sdružených gradientů.

4. ZÁKLADNÍ POJMY

Definice 1.

Soustavou m lineárních rovnic o n neznámých $x_1, x_2, \dots, x_n$ nazýváme soustavu

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1,\\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2,\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&\dots,\\
a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m,
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

kde $a_{11}, \dots, a_{mn}$, $b_1, \dots, b_m$ jsou daná reálná čísla.

Řešením soustavy (4.1) se nazývá každá taková uspořádaná n-tice reálných čísel $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$, tj. n-členný vektor, že při dosazení čísel $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ za neznámé $x_1, x_2, \dots, x_n$ jsou splněny všechny rovnice soustavy (4.1). Jsou-li $b_1, b_2, \dots, b_m = 0$, nazývá se soustava homogenní.

Definice 2.

Ekvivalentními soustavami lineárních rovnic nazýváme takové dvě soustavy lineárních rovnic (o stejném počtu neznámých $x_1, x_2, \dots, x_n$), kde každé řešení první soustavy je zároveň řešením druhé soustavy, a naopak.

Definice 3.

Maticí soustavy (4.1) nazýváme matici

(4.2)
$$A = \begin{pmatrix} a_{11}, & a_{12}, & \dots, & a_{1n} \\ a_{21}, & a_{22}, & \dots, & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}, & a_{m2}, & \dots, & a_{mn} \end{pmatrix}$$

a rozšířenou maticí soustavy (4.1) nazýváme matici

(4.3)
$$B = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}, & a_{12}, & \dots, & a_{1n} & b_1 \\ a_{21}, & a_{22}, & \dots, & a_{2n} & b_2 \\ \dots, & \dots, & \dots, & \dots & \dots \\ a_{m1}, & a_{m2}, & \dots, & a_{mn} & b_m \end{array} \right).$$

Definice 4.

Při zápisu soustavy (4.1) lze použít maticová forma zápisu

(4.4)
$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b},$$

kde $b = (b_1, \dots, b_m)^T$ se nazývá vektor pravých stran a vektor $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ se nazývá vektorem neznámých soustavy (4.1).

Definice 5.

Matice A ve vztahu (4.2) má hodnost $\boldsymbol{h(A) = r}$**,** existuje-li r lineárně nezávislých řádků, a je-li každý další řádek matice jejich lineární kombinací.

Věta 1 (Frobeniova věta).

Soustava (4.1) je řešitelná tehdy a jen tehdy, je-li hodnost matice A soustavy (4.1) rovna hodnosti řešené matice soustavy B, tedy $\boldsymbol{h(A) = h(B)}$.

Při určování hodnosti matice $h(A)$ lze postupovat převedením matice A na horní trojúhelníkový tvar použitím eliminačních úprav. Je nutné uvést, že hodnost matice se po jakékoli ekvivalentní úpravě nemění. Po těchto úpravách získáváme matici ve tvaru, kdy lze určit počet řešení. K tomuto účelu využijeme níže uvedenou Větu 2.

Poznámka 1. (Ekvivalentní úpravy)

Za základní čtyři ekvivalentní úpravy dané matice A považujeme:

- záměna pořadí řádků v matici,
- násobení jednoho řádku nenulovým číslem,
- přičtení k jednomu řádku lineární kombinaci ostatních řádků,
- vynechání řádku v matici, který je lineární kombinací ostatních řádků matice.

Věta 2.

Nechť soustava lineárních algebraických rovnic daná vztahem (4.1) má řešení, $h(A)$ je hodnost matice soustavy A a n je počet neznámých. Potom platí:

a) jestliže $h(A) = n$, pak má soustava (4.1) právě jedno řešení.

b) jestliže $h(A) < n$, pak má soustava (4.1) nekonečně mnoho řešení, přičemž za $n - h(A)$ neznámých lze volit libovolná reálná čísla a ostatní neznámé jsou určeny jednoznačně.

Definice 6.

Nechť je dána čtvercová matice A řádu n a nenulový vektor (sloupcová matice) u typu $(n, 1)$. Platí-li

$$\boldsymbol{Au} = \boldsymbol{\lambda u}, \tag{4.5}$$

tzn. vynásobení vektoru u zleva maticí A je ekvivalentní vynásobení vektoru u určitým číslem λ, nazýváme vektor u **vlastním *(*charakteristickým*)* vektorem** matice A a číslo λ příslušným **vlastním *(*charakteristickým*)* číslem** matice A. **Charakteristickou maticí** čtvercové matice

$$A = \begin{pmatrix} a_{11}, & a_{12}, & \dots, & a_{1n} \\ a_{21}, & a_{22}, & \dots, & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}, & a_{n2}, & \dots, & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

nazýváme matici

$$\lambda E - A = \begin{pmatrix} \lambda - a_{11}, & -a_{12}, & \dots, & -a_{1n} \\ -a_{21}, & \lambda - a_{22}, & \dots, & -a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -a_{n1}, & -a_{n2}, & \dots, & \lambda - a_{nn} \end{pmatrix}, \tag{4.7}$$

kde veličina λ je reálná nebo komplexní proměnná.

Definice 7.

Nechť A je čtvercová matice typu $n\ x\ n$. Množinu $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$ všech vlastních čísel matice A nazýváme spektrem matice A a značíme $s(A)$.

Číslo $\varrho(A) = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, \ldots, |\lambda_n|\}$ nazýváme spektrálním poloměrem matice A.

Definice 8.

Normou matice rozumíme číslo, které vyjadřuje velikost dané matice. Proto každá norma matice splňuje tyto vlastnosti.

$\| A \| \geqq 0$, $\| A \| = 0$ tehdy a jen tehdy, je-li $A = 0$,

$\| cA \| = |c| \| A \|$, kde c je libovolné reálné číslo,

$\| A + B \| \leqq \| A \| + \| B \|$,

$\| AB \| \leqq \| A \| \| B \| \|$.

Nyní můžeme definovat normu

$$\|A\|_E \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2 \right)^{1/2}, \tag{4.8}$$

kterou nazýváme Euklidovská norma matice A a normu

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \le i \le m, 1 \le j \le n} |a_{ij}|$$

Definice 9.

Nechť matice A je symetrická a pozitivně definitní. Pak normu

(4.9) $$\| x \|_A \equiv (x^T \cdot Ax)^{1/2}$$

nazveme energetickou normu vektoru x.

Definice 10.

Číslo

(4.10) $$K(\mathrm{A}) = \| \mathrm{A}^{-1} \| \| \mathrm{A} \|$$

nazýváme (spektrální) číslo podmíněnosti regulární matice A.

Definice 11.

Řekneme, že matice A je ostře diagonálně dominantní, jestliže

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, i \neq j}^{n} |a_{ij}| \,,$$

pro všechna $1 \leq i \leq n$.

Věta 4.

Nechť $A = (a_{ij})$ je symetrická ostře diagonálně dominantní matice s kladnými diagonálními prvky. Pak A je positivně definitní.

5. Metody řešení soustav lineárně algebraických rovnic

V další části práce se zaměříme na řešení SLAR o velikosti $n\,x\,n$. Zaveďme si proto soustavu

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ \dots + a_{1n}x_n \ &= b_1, \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ \dots + a_{2n}x_n \ &= b_2, \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&, \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ \dots + a_{nn}x_n \ &= b_n,
\end{aligned} \tag{5.1}
$$

na kterou se budeme odkazovat. Soustavu (5.1) lze zapsat v maticovém tvaru

$$
\begin{pmatrix} a_{11}\,, & a_{12}\,, & \dots, & a_{1n} \\ a_{21}\,, & a_{22}\,, & \dots, & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}\,, & a_{n2}\,, & \dots, & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}. \tag{5.2}
$$

Obecně zapíšeme jako

$$
Ax = b. \tag{5.3}
$$

Poznámka:

V případě řešení soustavy (5.3) v komplexním oboru lze úlohu převést na reálnou soustavu a řešit ji některou z dále v práci uvedených metod.

Předpokládejme soustavu (5.3), kde $A \in C^{NxN}$ označuje čtvercovou komplexní nesingulární matici řádu N, $x \in C^N$ vektor neznámých, $b \in C^N$ je vektor pravých stran. Vhodnou úpravou lze soustavu (5.3) převést řešení ekvivalentní soustavy v reálném oboru. Označme

$$A = ReA + ImA, \qquad x = Re\,x + Im\,x, \qquad b = Re\,b + Im\,b.$$

Pak jednou z možností přepisu soustavy (5.3) je reálná soustava

$$\begin{pmatrix} Re\,A & Im\,A \\ Im\,A & -Re\,A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Re\,x \\ -Im\,x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Re\,b \\ Im\,b \end{pmatrix}$$

se čtvercovou maticí řádu $2N$. Matice vzniklé soustavy je symetrická, pokud je symetrická matice A a problematika je podrobněji řešena v [4].

Při řešení SLAR nastávají tři případy. V důsledku Věty 1 a Věty 2 může nastat jedena z následujících možností. SLAR nemá žádné řešení, SLAR má právě jedno řešení nebo SLAR má nekonečně mnoho řešení. V našem případě se budeme zabývat SLAR mající právě jedno řešení, tzn., že matice soustavy A je čtvercová, regulární, tj. $\det A \neq 0$.

V diplomové práci se zaměříme na tři skupiny metod řešení SLAR.

První z nich jsou metody přímé. Do uvedené skupiny zahrnujeme takové metody, u kterých po konečném počtu kroků získáme přesné řešení. V naší práci si představíme základní metodu - Gaussova eliminace (GEM). Jako další uvedeme LU rozklad, Cramerovo pravidlo, výpočet pomocí inverzní matice.

Druhá, obsáhlejší skupina metod se nazývá iterační. Zde se zaměříme na lineární jednobodovou iterační metodu, stacionární iterační metodu a také se zmíníme o iterační metodě Jacobiově.

Iterační metody zahrnují i gradientní metody. Je to poněkud větší a specifická skupina metod. Jako zástupce této skupiny metod si uvedeme metodu sdružených gradientů.

5.1. OBECNÉ PODMÍNKY ŘEŠENÍ

Při numerickém výpočtu řešení soustavy (5.1) obdržíme obecně uspokojivé výsledky, pokud matice soustavy je dobře podmíněná. Proto při řešení SLAR musíme určovat, zda je či není soustava dobře podmíněná.

Špatně podmíněná soustava je taková soustava, kdy malá změna v matici soustavy vyvolá velkou změnu ve výsledném vektoru řešení. Naopak dobrá podmíněnost soustavy znamená, že malá změna v matici vyvolá malou změnu ve výsledném vektoru.

Jak ovšem zjistit zda daná soustava je dobře či špatně podmíněna? K odpovědi na tuto otázku využijeme již definované spektrální číslo podmíněnosti $K(A)$ regulární matice A. V případě, že $K(A)$ je velké, způsobí malá změna prvku matice soustavy A nebo složky pravé strany velkou změnu v jeho řešení. Ovšem, je-li toto číslo podmíněnosti malé a přitom

$$K(A) \geqq 1,$$

budou malým změnám v matici nebo pravé straně odpovídat pouze malé změny v řešení této soustavy.

Nyní označme jako x_c námi vypočítané řešení zadané soustavy (5.3).

Reziduum označíme

(5.4) $$r = b - Ax_c.$$

Přesné řešení soustavy označme x_t . Pro přesné řešení soustavy (5.3) platí

(5.5) $$Ax_t = b.$$

Reziduum pak můžeme vyjádřit ve tvaru

(5.6) $$r = A\,(x_t - x_c),$$

což lze upravit na tvar

(5.7) $$x_t - x_c = A^{-1}r.$$

Obsahuje-li vektor $x_t - x_c$ v absolutní hodnotě malé prvky, je obecně řešení soustavy rovnic přesnější. Je vždy zapotřebí uvážit, kterou metodu pro řešení dané soustavy vybereme s přihlídnutím k výhodám a nevýhodám uvažované metody. To ovšem neznamená, že vždy, kdy je reziduum malé, musí být řešení přesné.

Jak jsme se již zmínili, při řešení soustav rovnic se mohou vyskytnout chyby. Jeden zdroj chyby je nepřesnost koeficientů a pravé strany, druhým zdrojem jsou zaokrouhlovací chyby a třetím zdrojem jsou chybně stanovené metody řešení soustavy. U přímých metod obdržíme řešení po konečném počtu kroků. Pokud použijeme k řešení iterační metodu, nahrazujeme nekonečný iterační proces konečným algoritmem. Obecné podmínky řešení jsou podrobněji zkoumány v [4].

5.2. PŘÍMÉ METODY

Přímými metodami označujeme metody takové, kdy po konečném počtu operací získáme přesné řešení (neuvažujeme zaokrouhlovací chyby). Výpočet se provádí dle algoritmu, který se neopakuje. Pokud se jedná o větší soustavy (vyššího řádu než 30), výpočet přímou metodou je poněkud náročnější a pracnější. Využití přímých metod je proto vhodnější pro soustavy menšího řádu s plnou maticí. Pod tímto pojmem si představíme matici, která má velmi málo nulových prvků a je řádu do 30.

Téměř veškeré přímé metody jsou jistou obměnou základního algoritmu – Gaussovy eliminační metody.

5.2.1. GAUSSOVA ELIMINAČNÍ METODA A GAUSSOVA – JORDANOVA REDUKCE

Nyní popíšeme obecný postup řešení soustav lineárně algebraických rovnic pomocí Gaussovy eliminační metody. Princip této eliminace spočívá v převedení zadané soustavy lineárních algebraických rovnic na ekvivalentní soustavu, jejíž matice má horní trojúhelníkový tvar. Operace, které vedou k ekvivalentním soustavám, jsme již uváděli v Poznámce 1.

Nově vytvořená soustava je ekvivalentní a tudíž má stejnou množinu řešení jako soustava původní.

Uvažujme soustavu

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= a_{1,n+1},\\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= a_{2,n+1},\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&\dots,\\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= a_{n,n+1},
\end{aligned}
\tag{5.8}
$$

která splňuje předpoklady: matice koeficientů je regulární, $a_{11} \neq 0$.

První řádek vynásobíme číslem a_{21}/a_{11} a odečteme od druhého řádku. Dostáváme první koeficient druhého řádku roven nule. Dále postupujeme pro $i = 3, 4, \dots, n$ násobíme první řádek číslem a_{i1}/a_{11} a odčítáme ho od i-tého řádku. V tuto chvíli získáme pod diagonálou první sloupec nulový. Upravená soustava (5.9) se nazývá první přidružená soustava. V soustavě (5.8) jsme kromě prvního řádku eliminovali jednu neznámou – x_1.

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= a_{1,n+1},\\
a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n &= a_{2,n+1}^{(1)},\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&\dots,\\
a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n &= a_{n,n+1}^{(1)}.
\end{aligned}
\tag{5.9}
$$

Koeficienty $a_{ij}^{(1)}$ jsou dány následujícím obecným vzorcem

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} \cdot a_{1j}\,,\;\; i = 2, \dots, n,\;\; j = 2, 3, \dots, n+1.$$

V případě, že $a_{11} = 0$, zaměníme první řádek s jiným, v němž první koeficient je nenulový.

Dále pokračujeme analogicky ke k-tému řádku, až postupně celou matici převedeme na horní trojúhelníkový tvar. Postupně tak eliminujeme neznámé $x_2,\, x_3, \dots, x_{n-1}$ a získáváme tím druhou, třetí až *(n-1)*-ní přidruženou soustavu. Tyto přidružené soustavy jsou ekvivalentní se soustavou (5.8). Konečná ekvivalentní soustava s horní trojúhelníkovou maticí obecně má tvar:

(5.10)
$$\begin{array}{rcrcrcrcl}
a_{11}\, x_1 & + & a_{12}\, x_2 & + & \dots & + & a_{1n}\, x_n & = & a_{1,n+1}, \\
 & & a_{22}^{(1)}\, x_2 & + & \dots & + & a_{2n}^{(1)}\, x_n & = & a_{2,n+1}^{(1)}, \\
 & & & & \ddots & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & a_{n-1,n-1}^{(n-2)}\, x_{n-1} & + & a_{n-1,n}^{(n-2)}\, x_n & = & a_{n-1,n+1}^{(n-2)}, \\
 & & & & & & a_{n,n}^{(n-1)}\, x_n & = & a_{n,n+1}^{(n-1)}.
\end{array}$$

Přitom koeficienty lze vypočítat ze vztahu:

(5.11)
$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \cdot a_{kj}^{(k-1)}\,, k = 1, 2, \dots, n-1\;,$$

$$i = k+1, k+2, \dots, n\;, \qquad j = k+1, k+2, \dots, n+1$$

Nyní lze ze soustavy (5.10) vypočítat řešení původní soustavy (5.8) pomocí obecného vzorce:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i-1)}} \cdot \left(a_{i,n+1}^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)} x_j \right), \quad i = n, \dots, 1. \tag{5.12}$$

Postup výpočtu řešení se nazývá zpětná substituce. Nevýhoda při použití tohoto způsobu řešení je fakt, že při zadání stejného příkladu, pouze s obměnou pravé strany, se musí soustava řešit znovu. Tomuto nedostatku se vyhýbáme pomocí jiné, níže popsané metody, tzv. LU faktorizace.

V tuto chvíli je vhodné zmínit se o možnosti výběru hlavního prvku při Gaussově eliminaci. Ten se provádí v případě, kdy vznikají nepřesnosti v důsledku zaokrouhlování.

Před výpočtem prvků přidružené matice soustavy vybereme z prvků

$$a_{kk}^{(k-1)}, a_{k+1,k}^{(k-1)}, \dots, a_{nk}^{(k-1)}, a_{k,k+1}^{(k-1)}, a_{k+1,k+1}^{(k-1)}, \dots, a_{n,k+1}^{(k-1)}, \dots, a_{kn}^{(k-1)}, a_{k+1,n}^{(k-1)}, \dots, a_{nn}^{(k-1)}$$

nenulový prvek $a_{ij}^{(k-1)}$. Tento prvek nazýváme hlavním prvkem. V tuto chvíli zaměníme i-tý a k-tý řádek, j-tý a k-tý sloupec. Současně zaměníme neznámé x_k a x_j a pokračujeme dále, podle výše uvedeného postupu.

Gaussova-Jordanova redukce je algoritmus, který vychází z Gaussovy eliminační metody, eliminují se však vždy prvky nejen pod diagonálními prvky matice soustavy, ale i nad nimi.

Po dokončení výpočtu (5.10) nyní budeme postupovat od posledního řádku k prvnímu. Postupně anulujeme všechny sloupce stejným způsobem, jako jsme se již výše zmiňovali.

V tuto chvíli získáváme vztah (5.13):

$$(5.13)\qquad \begin{array}{cccccc} a_{11}x_1 & 0 & \cdots & 0 & = & a_{1,n+1}^{(n-1)}, \\ 0 & a_{22}^{(1)}x_2 & & \vdots & = & a_{2,n+1}^{(n-1)}, \\ \vdots & & \ddots & 0 & = & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n}^{(n-1)}x_n & = & a_{n,n+1}^{(n-1)}. \end{array}$$

Řešení je pak dáno vztahem:

$$x_i = \frac{a_{i,n+1}^{(n-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}}, \qquad i = 1, 2, \dots, n.$$

Je zřejmé, že výsledný vztah u Gaussovy-Jordanovy redukce je jednodušší. Ovšem Gaussova eliminace je efektivnější. To vyplývá z počtu operací potřebných k získání řešení. V Gaussově eliminaci budeme uvažovat pouze ty kroky, ve kterých se objevilo násobení a dělení. K tomu využijeme vztahu (5.11). Výsledný celkový počet operací M je dán vztahem

$$(5.14)\qquad M = \sum_{k=1}^{n-1}[(n-k)(n-k+1) + (n-k)] = \frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$$

Za početní operaci pokládáme násobení a dělení, které jsme použili při výpočtu.

V případě Gaussovy – Jordanovy eliminace je výsledný počet operací M dán vztahem

$$(5.15)\qquad M = \frac{1}{2}\, n^3 + O(n^2).$$

Nás zajímá M především v případě, kdy jsou n velká. Proto jsme člen obsahující n^3 oddělili od ostatních symbolů. Jelikož ve vztahu (5.14) se vyskytuje člen $\frac{1}{3}n^3$ a ve vztahu (5.15) člen $\frac{1}{2}n^3$, je pro velké n zapotřebí k provedení Gaussovo –Jordanovy eliminace přibližně o 50% více operací než k provedení Gaussovy eliminace. O této problematice se hlouběji dovíme v literatuře [4].

Na závěr si uveďme příklad, kde využijeme k řešení Gaussovy eliminace soustavy 3 lineárních algebraických rovnic o třech neznámých.

Máme řešit soustavu rovnic:

$$-2x_1 + \ x_2 + \ x_3 = \ \ 1$$

$$4x_1 + \ x_2 \qquad = -2$$

$$-2x_1 + 2x_2 + x_3 = \ \ 7$$

Řešená matice soustavy B má tvar

$$B = \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 & -2 \\ -2 & 2 & 1 & 7 \end{array}\right).$$

Pomocí ekvivalentních úprav matici A eliminuji tak, aby se pod diagonálou nacházeli samé nuly

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 & -2 \\ -2 & 2 & 1 & 7 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 4 \\ 0 & 3 & 2 & 8 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 4 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right).$$

V první úpravě jsme první řádek vynásobili 2 a odečetli od druhého řádku. Třetí řádek jsme pouze přičetli k prvnímu řádku. V další úpravě jsme druhý řádek vynásobili 3 a odečetli od třetího řádku. V poslední úpravě jsme pouze vydělili poslední řádek 4.

Zde Gaussova eliminační metoda končí. Pokud bychom počítali nuly i nad diagonálou, jednalo by se o Gaussovu Jordanovu metodu.

Provedeme zpětný chod Gaussovy eliminace.

$\mathbf{1x_3 = 1}$

$1x_2 + 2x_3 = 4 \Rightarrow 1x_2 = 4 - 2 \Rightarrow \boldsymbol{x_2 = 2}$

$2x_1 + x_2 + x_3 = 1 \Rightarrow 2x_1 + 2 + 1 = 1 \Rightarrow \boldsymbol{x_1 = -1}$

Řešením soustavy je vektor $(x_1, x_2, x_3)^T = (-1, 2, 1)^T$.

5.2.2. LU – Faktorizace

Tato metoda je založena na rozkladu čtvercové matice A na součin dvou matic, které označujeme L a U, kde L je dolní trojúhelníková matice a U horní trojúhelníková matice. Každou regulární matice lze rozložit na uvedený součin. Následující řešení SLAR využije vypočtený rozklad

(5.16) $$\mathbf{A = LU}.$$

Obvykle diagonální prvky matice L volíme rovny hodnotě 1. Matice L tedy obsahuje v diagonále jedničky a pod ní násobitele l_{ij} v Gaussově eliminaci, U je horní trojúhelníková matice po Gaussově eliminaci. Matice L i U lze počítat přímo bez provádění Gaussovy eliminace.

Pak lze soustavu (5.3) přepsat ve tvaru

$$\boldsymbol{LUx} = \boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}. \tag{5.17}$$

Nejprve vypočítáme

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \tag{5.18}$$

a poté

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}. \tag{5.19}$$

Matice U a L se získají postupně pro $r = 1, \dots, n$ dle vztahů (5.20) a (5.21).

$$l_{ir} = \frac{1}{u_{rr}}\left(a_{ir} - \sum_{s=1}^{r-1} l_{is}u_{sr}\right), i = r+1, \dots, n. \tag{5.20}$$

$$u_{ir} = a_{ir} - \sum_{s=1}^{i-1} l_{is}u_{sr}\ ,\ \ i = 1, \dots, r \tag{5.21}$$

Řešení soustav pak vyplývá ze vztahů:

$$y_i = b_i - \sum_{s=1}^{i-1} l_{is}y_s\ \ i = 1, \dots, n \tag{5.22}$$

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}\left(y_i - \sum_{s=i+1}^{n} u_{is}x_s\right). \tag{5.23}$$

Ve vztahu (5.23) předpokládáme, že u_{rr} je nenulové. Pokud tomu tak není, opět využijeme algoritmus s výběrem hlavního prvku.

LU rozklad je vhodné použít například v případě, kdy máme řešit několik SLAR, které se liší pouze ve vektoru pravých stran soustavy.

Pro názornost jsme zvolili následující příklad.

Př.: Řešme danou soustavu:

$$2x_1 + \quad 4x_2 + \quad 6x_3 = 6$$

$$4x_1 + 13x_2 + 13x_3 = 8$$

$$6x_1 + 32x_2 + 25x_3 = 5$$

Převedeme na maticový zápis $Ax = b$:

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 4 & 13 & 13 \\ 6 & 32 & 25 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 8 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

Nyní matici A vyjádříme jako násobek matice L a U. Pomocí vztahů (5.20) a (5.21) vypočteme matici L

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}$$

i matici U

$$U = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 0 & 5 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Po dosazení do vztahu (5.18)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 8 \\ 5 \end{pmatrix}$$

lze postupně vypočítat všechny neznámé.

$\boldsymbol{y_1} = \mathbf{6}$

$2\boldsymbol{y_1} + \boldsymbol{y_2} = 8$

$\boldsymbol{y_2} = 8 - 2\boldsymbol{y_1} = 8 - 12 = \mathbf{-4}$

$3\boldsymbol{y_1} + 4\boldsymbol{y_2} + \boldsymbol{y_3} = 5$

$\boldsymbol{y_3} = 5 - 3\boldsymbol{y_1} - 4\boldsymbol{y_2} = 5 - 18 + 16 = \mathbf{3}$

$\boldsymbol{y} = (\mathbf{6}, \mathbf{-4}, \mathbf{3})^{\boldsymbol{T}}$

Po určení vektoru y můžeme dosadit do vztahu (5.19) a vypočítat hledaný vektor x.

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 0 & 5 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -4 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Zde naopak řešíme pomocí zpětného chodu.

$3x_3 = 3$

$\boldsymbol{x_3 = 1}$

$5x_2 + x_3 = -4$

$5x_2 = -4 - x_3 = -4 - 1 = -5$

$\boldsymbol{x_2 = -1}$

$2x_1 + 4x_2 + 6x_3 = 6$

$2x_1 = 6 - 4x_2 - 6x_3 = 6 + 4 - 6 = 4$

$\boldsymbol{x_1 = 2}$

Hledaný vektor, který je zároveň i řešením zadané soustavy je vektor

$$\boldsymbol{x = (2, -1, 1)^T}.$$

5.2.3. CRAMEROVO PRAVIDLO

Je dána soustava n lineárních rovnic o n neznámých

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ \dots + a_{1n}x_n &= b_1,\\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ \dots + a_{2n}x_n &= b_2,\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&,\\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ \dots + a_{nn}x_n &= b_n.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Tuto soustavu vyjádříme maticovým zápisem

$$\begin{pmatrix} a_{11}, & a_{12}, & \dots, & a_{1n} \\ a_{21}, & a_{22}, & \dots, & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}, & a_{n2}, & \dots, & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}. \tag{5.25}$$

Nyní uveďme, v čem spočívá výpočet Cramerovým pravidlem pomocí užití následující Věty 3.

Věta 3. (Cramerovo pravidlo)

Nechť D je determinant matice A a D_i determinant matice, která vznikne z matice A nahrazením i-tého sloupce sloupcem pravých stran b. Pak pro i-tou neznámou platí:

$$x_i = \frac{D_i}{D},\ i = 1, 2, \dots, n. \tag{5.26}$$

Uvedenou metodou lze řešit soustavy o nižším počtu neznámých. Konkrétně zde nastává problém v počítání determinantů vyšších řádů. Výpočet je pak zdlouhavý a vzniká velké riziko výskytu početních chyb. Výhoda této metody spočívá v možnosti výpočtu pouze některých neznámých, protože každá neznámá se počítá zvlášť, bez potřeby určení zbylých neznámých.

Pro jednodušší výpočet jsme zvolili příklad soustavy o dvou neznámých.

$$2x_1 + \ \ x_2 = \ \ 7$$

$$7x_1 - 9x_2 = 12$$

Soustavu si převeďme na maticovou formu zápisu

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 7 & -9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 12 \end{pmatrix}.$$

Vypočítáme si determinant matice soustavy

$$D = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 7 & -9 \end{vmatrix} = -7.1 - 2.(-9) = -25.$$

Dosadíme vektor pravé strany za první sloupec determinantu a spočítáme D_1.

$$D_1 = \begin{vmatrix} 7 & 1 \\ 12 & -9 \end{vmatrix} = 7.(-9) - 12.1 = -63 - 12 = -75.$$

Pokračujeme dosazením vektoru pravé strany za druhý sloupec determinantu a spočítáme D_2.

$$D_2 = \begin{vmatrix} 2 & 7 \\ 7 & 12 \end{vmatrix} = 2.12 - 7.7 = 24 - 49 = -25.$$

Dosadíme do vztahu (5.23) a získáme kořeny zadané soustavy rovnic.

$$\boldsymbol{x_1} = \frac{-75}{-25} = \mathbf{3}\,,$$

$$\boldsymbol{x_2} = \frac{-25}{-25} = \mathbf{1}\,.$$

5.2.4. METODA ŘEŠENÍ POMOCÍ INVERZNÍ MATICE

Metoda řešení za pomoci inverzní matice je početně náročnější. Ze vztahu (5.3) osamostatníme vektor x tím, že spočteme příslušnou inverzní matici A^{-1} k matici A. Výsledek úpravy vztahu (5.3) je vztah

(5.27) $$x = A^{-1}b \quad .$$

Vynásobením inverzní matice A^{-1} s vektorem b získáme hledaný vektor x.

Výpočet inverzní matice můžeme provést pomocí subdeterminantů a jejich doplňku.

Pro názornější představu si spočteme následující příklad.

Př. Najděme řešení zadané soustavy rovnic $Ax = b$, kde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

a

$$b = (1\,,3\,,1)^T.$$

Nejprve si vypočítáme inverzní matici A^{-1}.

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 3 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 4 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 3 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 3 & 5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2 & -1/2 & 1 \end{array}\right) \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 3 & 0 & 7/2 & 5/2 & -5 \\ 0 & 1 & 0 & 3/2 & 1/2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2 & -1/2 & 1 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 & 1/2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2 & -1/2 & 1 \end{array}\right)$$

Získali jsme inverzní matici

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & -2 \\ -1/2 & -1/2 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & 2 \\ 3 & 1 & -4 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Vynásobíme matici $A^{-1}.\,b$

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & -2 \\ -1/2 & -1/2 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Hledaný výsledek je vektor $x = (3\,, 1, -1)^T$.

5.3. ITERAČNÍ METODY

Iterační metody jsou metody, které pro libovolně zvolenou počáteční aproximaci x_0 umožňují konstruovat posloupnost vektorů $x_k,\ k \geq 0$. Je zřejmé, že cílem je konstruovat konvergentní metody v tom smyslu, že pro libovolnou počáteční aproximaci x_0 posloupnost $\{x_k\}$ konverguje k přesnému řešení soustavy (5.1).

Lépe řečeno začneme s počátečním vektorem x_0 a sestrojíme posloupnost vektorů x_0 podle rovnice

(5.28) $$x_{i+1} = F_i(x_i\,, x_{i-1}\,, \dots\,, x_{i-k}),$$

kde index i značí, že iterační lineární funkce F se může měnit od jedné iterace k druhé.

Pro většinu soustav řešených pomocí iteračních metod platí, že čím větší přesnost výpočtu požadujeme, tím více výpočtů (kroků) je potřeba uskutečnit. Zde je vhodné zmínit se o použití těchto metod řešení. Iterační metody řešení soustav se využívají převážně pro výpočet velmi velkých soustav rovnic. Takové soustavy vznikají například při numerickém řešení parciálních diferenciálních rovnic. Iterační metody jsou obecně méně náročné na paměť počítače.

V následující kapitole se zaměříme na jednobodové maticové iterační metody a později i na stacionární iterační metody. Podrobněji a šířeji je problematika popsána v [4].

5.3.1. LINEÁRNÍ JEDNOBODOVÁ MATICOVÁ ITERAČNÍ METODA

Základní tvar této metody má tvar

(5.29) $$x_{i+1} = B_i x_i + c_i.$$

Soustavu (5.3) si přepíšeme do tvaru

(5.30) $$(\mathrm{I} + \mathrm{A})\mathrm{x} = \mathrm{x} + \mathrm{b},$$

což lze upravit na tvar

(5.31) $$\mathrm{x} = (\mathrm{I} + \mathrm{A})\mathrm{x} - \mathrm{b}.$$

Pomocí tohoto tvaru je lépe viditelná iterační metoda vyjádřena rovnicí

(5.32) $$\mathrm{x}_{\mathrm{i}+1} = (\mathrm{I} + \mathrm{A})\mathrm{x}_{\mathrm{i}} - \mathrm{b}.$$

Nyní již vidíme vzájemný vztah rovnice (5.29) s rovnicí rovnicí (5.32). Hledáme takové řešení x_t soustavy (5.3), které bude pevným bodem rovnice (5.29). Musí tedy platit

(5.33) $$x_t = B_i x_t + c_i \text{ pro všechna } i.$$

Víme, že

(5.34) $$x_t = A^{-1}b,$$

dostáváme

(5.35) $$x_t = B_i A^{-1} b + c_i.$$

Z této rovnice vyjádříme c_i

(5.36) $$c_i = (I - B_i)A^{-1}b = C_i b$$

Je potřebné zdůraznit, že matice C_i a B_i jsou nezávislé na vektoru b. Platí tedy

(5.37) $$(I - B_i)A^{-1} = C_i \,.$$

Po zjednodušení lze napsat

(5.38) $$C_i A + B_i = I.$$

Tento tvar nám udává podmínku tzv. konzistence matic B_i a C_i. V této chvíli je možné zapsat rovnici (5.29) ve známějším tvaru

(5.39) $$x_{i+1} = B_i x_i + C_i b$$

a zavést tak substituci $\varepsilon_i = x_i - x_t$. Dosadíme do rovnice (5.37) a (5.39) a získáváme

(5.40)

$$\varepsilon_{i+1} = B_i x_i + C_i b - x_t = B_i x_i + C_i b - A^{-1}b = B_i x_i + B_i A^{-1} b = B_i x_i - B_i x_t = B_i \varepsilon_i.$$

Za počáteční aproximaci řešení soustavy (5.3) pokládáme x_0 Platí tedy

(5.41) $$\varepsilon_{i+1} = K_i \varepsilon_1 ,$$

kde

(5.42) $$K_i = B_i \, B_{i-1} \, \dots B_1 .$$

Posloupnost $\{x_i\}$ konverguje k x_t při libovolné počáteční aproximaci x_0 právě tehdy, jestliže platí nutná a postačující podmínka

(5.43) $$\lim_{i \to \infty} K_i y = 0 \text{ pro všechna y.}$$

Uveďme si i jednu z postačujících podmínek:

(5.44) $$\lim_{i \to \infty} \|\varepsilon_i\| = 0 .$$

Pro stacionární iterační metody uveďme i postačující podmínku konvergence ve znění:

(5.45) $$\lim_{i \to \infty} \rho(K_i) = 0 .$$

5.3.2. STACIONÁRNÍ ITERAČNÍ METODA

Stacionární iterační metody jsou počtářsky výhodnější. I jejich analýza je jednodušší oproti výše uvedeným metodám. Proto si následně přiblížíme jednu takovouto metodu – Jacobiovu iterační metodu.

Nejdříve si tyto metody přiblížíme obecně. U těchto metod již přeznačíme matici B_i z předchozí kapitoly pouze na matici B a stejně tak i matici $C_i = C$. To proto, že se během jednotlivých iterací již nemění, jako tomu tak bylo u předchozí metody. Takže vztah (5.42) můžeme přepsat jako $K_i = B^i$. Vlastní čísla matice B^i jsou totožné s i-tými mocninami matice B. Uveďme si jednu postačující podmínku konvergence přibližných řešení

(5.46) $$\|B\|_E < 1.$$

V souvislosti s konvergencí se ptáme na rychlost konvergence. Ze vztahu

(5.47) $$\varepsilon_{i+1} = K_i \varepsilon_1$$

plyne nerovnost

(5.48) $$\|\varepsilon_{i+1}\| \leq \|K_i\| \|\varepsilon_i\| \leq \|B\|^i \|\varepsilon_i\|.$$

Tento vztah nám určuje, zda daná iterační metoda bude konvergovat rychleji. Závisí to tedy na velikosti spektrální normy. Čím menší tato norma matice B bude, tím rychleji bude iterační metoda konvergovat.

Matice B symetrická je nebo není. Pokud je symetrická, což není častým jevem, je spektrální norma rovna spektrálnímu poloměru a v tomto případě nám spektrální poloměr udává rychlost konvergence. Častým jevem bývá matice nesymetrická. Zde bohužel nelze využít spektrálního poloměru k určení konvergence. V tomto případě pouze víme, že platí vztah

(5.49) $$\rho(B) \leq \|B\|.$$

Podrobněji o rychlosti konvergence se pojednává v [4].

5.3.3. JACOBIOVA ITERAČNÍ METODA

Tato iterační metoda není známá pouze jako Jacobiova iterační metoda, ale také jako metoda současné opravy. Tento název vyplývá z metody jeho řešení. Prakticky každá složka přibližného řešení – čili vektor – se nejprve změní a následně se použije v dalším kroku. Při této metodě rozepíšeme matici

(5.50) $$B = -D^{-1}(L + U).$$

Po dosazení do vztahu

(5.51) $$\|B\|_E < 1$$

získáme vztah

(5.52) $$\|-D^{-1}(L + D)\|_E < 1$$

a obdržíme podmínku konvergence metody.

Nyní si na úvod rozpravy o Jacobiově iterační metodě uveďme několik pojmů a označení, které jsme již využili v předešlém odstavci. Pod označením D míníme diagonální matici. L (respektive U) označujeme dolní (respektive horní) trojúhelníkovou matici s nulovými prvky na diagonále. Po uvedení používaného označení smíme matici A zapsat ve tvaru:

(5.53) $$A = D + L + U,$$

Pak můžeme psát

$$Ax = b$$

$$(D + L + U)x = b$$

(5.54) $$Dx = -(L + U)x + b.$$

Využijeme iterační metodu ve tvaru

(5.55) $$x_{i+1} = -D^{-1}(L + U)x_i + D^{-1}b\ .$$

Předpokládejme, že hlavní diagonála matice obsahuje pouze nenulové prvky. Jestliže hlavní diagonála obsahuje nulové prvky, je možné pomocí výměny řádků a sloupců získat regulární matici D. To samozřejmě lze provést za předpokladu, že matice A je regulární. Jeden z dalších předpokladů je, že na diagonále jsou oproti ostatním prvkům matice, ty největší prvky. Pro snadnější pochopení a orientaci si zvolme $x_1 = 0$. Pak $x_2 = D^{-1}b$.

Tato metoda se v praxi příliš nevyužívá. Velmi těžko se určuje její konvergence. Výhodu ovšem vidíme v průběhu řešení, jelikož se využívá výsledků z předchozích iterací. To si ukážeme na uvedeném příkladě.

Máme zadanou matici A, vektor b a známe dokonce i výsledný vektor x .

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 2 & 4 \\ 2 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}\ ,\ b = \begin{pmatrix} 14 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix},\ x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Matici A rozložíme na horní a dolní trojúhelníkový tvar a diagonální matici

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}\ ,\quad U = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ ,\quad D = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$D^{-1}(L+U) = \begin{pmatrix} 1/10 & 0 & 0 \\ 0 & 1/5 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 0 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/5 & 2/5 \\ 2/5 & 0 & 1/5 \\ 1/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix} .$$

Zvolíme $x_0 = (0,0,0)^T$

$$\boldsymbol{x_1} = -b.x_0 + D^{-1}b = O + \begin{pmatrix} 1/10 & 0 & 0 \\ 0 & 1/5 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 14 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14/10 \\ 3/5 \\ 4/3 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{1,4} \\ \mathbf{0,6} \\ \mathbf{1,33} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x_2} = -\begin{pmatrix} 0 & 1/5 & 2/5 \\ 2/5 & 0 & 1/5 \\ 1/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 14/10 \\ 3/5 \\ 4/3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 14/10 \\ 3/5 \\ 4/3 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0{,}653 \\ 0{,}826 \\ 0{,}666 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{0,747} \\ \mathbf{-0,226} \\ \mathbf{0,664} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x_3} = -\begin{pmatrix} 0 & 1/5 & 2/5 \\ 2/5 & 0 & 1/5 \\ 1/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 0{,}747 \\ -0{,}226 \\ 0{,}664 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}2204 \\ 0{,}4316 \\ 0{,}17193 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{1,1796} \\ \mathbf{0,1684} \\ \mathbf{1,15807} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x_4} = -\begin{pmatrix} 0 & 1/5 & 2/5 \\ 2/5 & 0 & 1/5 \\ 1/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 1{,}1796 \\ 0{,}1684 \\ 1{,}15807 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} =$$

$$= -\begin{pmatrix} 0{,}4946 \\ 0{,}70345 \\ 0{,}44484 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0,9031} \\ \mathbf{-0,10345} \\ \mathbf{0,88516} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x_5} = -\begin{pmatrix} 0 & 1/5 & 2/5 \\ 2/5 & 0 & 1/5 \\ 1/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 0{,}9031 \\ -0{,}10345 \\ 0{,}88516 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} =$$

$$= -\begin{pmatrix} 0{,}333374 \\ 0{,}538272 \\ 0{,}2638845 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}4 \\ 0{,}6 \\ 1{,}33 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1{,}066626} \\ \mathbf{0{,}061728} \\ \mathbf{1{,}0661155} \end{pmatrix}$$

Jak vidíme, s počtem přibývajících kroků se blížíme k přesnému řešení dané SLAR.

5.4. METODA SDRUŽENÝCH GRADIENTŮ

V tomto odstavci se zaměříme na metodu sdružených gradientů. Předpokládejme, že matice A soustavy (5.3) je symetrická a pozitivně definitní. Ukážeme, že pak nalezení řešení soustavy užitím MSG je ekvivalentní úloze hledání minima kvadratického funkcionálu,

(5.56) $$y(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b.$$

V průběhu výpočtu se konstruují tři posloupnosti vektorů – sdružených vektorů, reziduí a přibližných řešení. Ukážeme, že každá posloupnost reziduí se skládá z vektorů, které jsou lineárně nezávislé. Posloupnost přibližných řešení vektorů x_n, kde n udává řád soustavy (5.3), konverguje k přesnému řešení soustavy (5.3). Následující věta udává vztah řešení soustavy (5.3) a minima funkcionálu (5.56).

Věta 5.

Nechť A je symetrická a pozitivně definitní matice a x_t je přesným řešením soustavy matice (5.3). Pak funkcionál (5.56) nabývá jediného minima v bodě x_t a neexistuje žádné jiné lokální minimum funkcionálu (5.56).

Důkaz:

$y(x_t + \Delta x) - y(x_t)$=

$$= \frac{1}{2}(x_t + \Delta \mathrm{x})^T A(x_t + \Delta \mathrm{x}) - (x_t + \Delta \mathrm{x})^T b - \frac{1}{2} x_t^T A x + x_t^T b =$$

$$= \frac{1}{2} x_t^T A x_t + \frac{1}{2} \Delta x^T A x_t + \frac{1}{2} x_t^T A \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T A \Delta x - x_t^T b - \Delta x^T b -$$

$$- \frac{1}{2} x_t^T A x + x_t^T b = \Delta x^T A x_t + \frac{1}{2} \Delta x^T A \Delta x - \Delta x^T b =$$

$$= \frac{1}{2} \Delta x^T A \Delta x + \Delta x^T (A x_t - b) = \frac{1}{2} \Delta x^T A \Delta x > 0$$

Z vyjádření rozdílu $y(x_t + \Delta \mathrm{x}) - y(x_t)$ vidíme, že funkcionál (5.56) nabývá minima v bodě x_t.

Dále ukážeme, že funkcionál (5.56) nenabývá jiného lokálního maxima. Uvažujme dále $x \neq x_t$ a označme $r = b - Ax$, $r \neq o$ (neboť $x \neq x_t$), $\alpha \in R$, $\alpha \neq 0$. Pak

$$y(x + \alpha r) - y(x) = \frac{1}{2}(x + \alpha r)^T A(x + \alpha r) - (x + \alpha r)^T b - \frac{1}{2} x^T A x + x^T b =$$

$$= \frac{1}{2} x^T A x + \frac{1}{2} \alpha r^T A x + \frac{1}{2} \alpha x^T A r + \frac{1}{2} \alpha^2 r^T A r - x^T b - \alpha r^T b - \frac{1}{2} x^T A x + x^T b =$$

$$= \alpha r^T A x + \frac{1}{2} \alpha^2 r^T A r - \alpha r^T b = \alpha r^T (A x - b) + \frac{1}{2} \alpha^2 r^T A r =$$

$$= -\alpha r^T r + \frac{1}{2} \alpha^2 r^T A r.$$

Platí tedy $y(x+\alpha r)-y(x)=-\alpha r^T r+\frac{1}{2}\alpha^2 r^T A r.$

Pro dostatečně malé α změní znaménko pravá strana rovnosti, zaměříme-li $-\alpha$ za α, a tudíž v bodě x nenastává lokální minimum.

Popišme algoritmus metody sdružených gradientů.

Uvažujme následující algoritmus metody sdružených gradientů. Nechť x_0 je počáteční aproximace řešení soustavy (5.3) taková, že $Ax_0 \neq b.$ Pak položme

(5.57) $$p_0 = r_0 = b - Ax_0$$

a definujme

(5.58) $$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k} \ ,$$

(5.59) $$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \ ,$$

(5.60) $$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \ ,$$

(5.61) $$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k} \ ,$$

(5.62) $$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \ ,$$

pro $k = 0,1, \dots m$, kde m je nejvyšší hodnota indexu, pro kterou $r_k \neq 0.$

V tomto algoritmu pokračujeme tak dlouho, dokud $r_k \neq 0.$

Dále platí následující tvrzení.

Věta 6.

Nechť vektory $x_1, \dots, x_m$ a $r_0, \dots, r_m$ (přitom $r_k \neq 0$ pro $k = 0, 1, 2, \dots, m$) jsou určeny vztahy (5.57) až (5.62).

Pak platí

$r_k = b - Ax_k$, tj. $r_0, \dots, r_m$ představují posloupnost reziduí.

Důkaz:

Důkaz provedeme matematickou indukcí.

1. část

Pro r_0 platnost plyne ze vztahu (5.57).

2. část

Předpokládáme nyní, že $r_k = b - Ax_k$ a ukažme platnost pro $k + 1$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_n = b - Ax_k - \alpha_k A p_n = b - Ax_k - (A\alpha_{k+1} - Ax_k) =$$

$$= b - Ax_{k+1}.$$

Věta 7.

Vektory r_k, $k = 0,1,2, \dots, m$, jsou lineárně nezávislé.

Důkaz:

Platí tedy $r_k^T r_k \neq 0$ pro $k \in \{0,1,2, \dots, m\}$.

Předpokládejme, že vektory $\{r_k\}_{k=0}^m$ jsou lineárně závislé. Pak existují reálná $c_0, \dots, c_m$ a celé číslo $l \in \{0,1, \dots, m\}$ takové, že $c_l \neq 0$ a

$$\sum_{k=0}^{m} c_k r_k = 0$$

$$0 = r_l^T \left(\sum_{k=0}^{m} c_k r_k \right) = \sum_{k=0}^{m} c_k c_l^T r_k = c_l r_l^T r_l,$$

Což je ve sporu s $r_l^T r_l \neq 0$ a $c_l \neq 0$. Vektory $\{r_k\}_{k=0}^{m}$ jsou tedy lineárně nezávislé.

<u>Důsledek:</u>

Znamená to, že musí nutně platit $m \leq n - 1$. Jelikož v n – rozměrném prostoru E_n existuje maximálně a metoda konverguje nejvýše v n iteracích.

Věta 8.

Nechť $r_i \neq o$ pro $i = 0,1,2, \dots, m$. Pak pro všechna $k, l \in \{0,1,2, \dots m\}, k \neq l$ platí

$r_k^T r_l = 0$, rezidua jsou vzájemně ortogonální

$p_k^T A \, p_l = 0$, vektory p_k jsou tedy A – ortogonální.

Důkaz je uveden v [4].

Věta 9.

Pro funkcionál (5.56) a aproximace řešení x_k obdržené MSG (5.57) – (5.62) soustavy (5.3) platí:

$$y(x_{k+1}) < y(x_k) \, , k = 1,2,3, \dots, m \quad ,$$

$$m \leq n - 1$$

Důkaz:

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \frac{1}{2}x_{k+1}^T A x_{k+1} - x_{k+1}^T b - \frac{1}{2}x_k^T A x_k \ + x_k^T b =$$

$$= \frac{1}{2}(x_k + \alpha_k p_k)^T A(x_k + \alpha_k p_k) - (x_k + \alpha_k p_k)^T b - \frac{1}{2}x_k^T A x_k + x_k^T b =$$

$$= \frac{1}{2}x_k^T A x_k \ + \frac{1}{2}\alpha_k \ p_k^T A x_k \ + \frac{1}{2}\alpha_k \ x_k^T A p_k \ + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k \ - x_k^T b -$$

$$-\alpha_k \ p_k^T b \ - \frac{1}{2}x_k^T A x_k \ + x_k^T b = \alpha_k \ p_k^T A x_k \ - \alpha_k p_k^T b + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k \ =$$

$$= \alpha_k p_k^T(Ax_k - b) + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k \ = -\alpha_k p_k^T r_k + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k \ =$$

$$= -\alpha_k \ \left(r_k + \beta_{k-1}p_{k-1}\right)^T r_k + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k \ =$$

$$= \alpha_k(r_k^T r_k + \beta_{k-1}p_{k-1}^T r_k) + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k =$$

$$= -\alpha_k r_k^T r_k + \frac{1}{2}\alpha_k^2 p_k^T A p_k =$$

$$= \frac{-\|r_k\|_E^2}{p_k^T A p_k} \cdot \|r_k\|_E^2 \quad + \frac{1}{2}\frac{\|r_k\|_E^4}{(p_k^T A p_k)^2} \cdot p_k^T A p_k =$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{\|r_k\|_E^4}{p_k^T A p_k} < 0.$$

Odtud vyplývá

$$y(x_{k+1}) < y(x_k) \ ,$$

což bylo třeba dokázat.

MSG můžeme považovat za konečnou n-krokovou metodu. Je sice méně výhodná na počet operací oproti GEM. Ovšem v případě řídkých matic je počet operací výrazně menší. Vyplývá to ze vztahů (5.54 – 5.59). Při každé iteraci MGS se při výpočtu využije původní matice A.

Při použití MSG, přesné řešení nezískáme. Je to z důvodu načítání zaokrouhlovacích chyb. V závěrečné části se zaměříme na numerické řešení obyčejné diferenciální rovnice druhého řádu a uvidíme, že i po několika iteracích je řešení soustavy velice blízké přesnému řešení. Provádíme – li výpočet dále pro $k > n$, platí vztah

(5.63) $$\|\varepsilon_{k+1}\| < \|\varepsilon_k\|, \quad \text{kde} \quad \varepsilon_k = x_t - x_k\,,$$

pokud tomu zaokrouhlovací chyba v jedné iteraci nezabrání. Pokud úloha nevyžaduje velmi přesné řešení, je možné říci, že metoda MSG zmenší celkový objem výpočtů, a tím se projeví i vyšší využití při výpočtu za pomocí počítačů.

Při řešení skutečných technických problémů často vznikají velmi rozsáhlé soustavy obtížně řešitelné přímými metodami v důsledku omezení operační paměti počítače. MGS se často užívá pro rozsáhlé soustavy, přičemž matice je řídká a pásová.

6. Příklady řešení daných lineárních soustav užitím metody sdružených gradientů

V této části se zaměříme na řešení SLAR za pomoci programu MSG dané vztahy (5.57) – (5.62), který jsme naprogramovali v Matlabu. Výpis programu je uveden v příloze číslo 1. Ukážeme na praktických úlohách, že při řešení SLAR pomocí MSG se výsledný vektor opravdu blíží k přesnému řešení. Rychlost konvergence metody je dána vztahem uvedeným v [5, str. 107]. Uvedeme si několik příkladů řešení soustav s řídkou a pásovou maticí, a budeme demonstrovat princip MSG. V tabulkách si vyhodnotíme výsledky jednotlivých iterací a porovnáme s přesným řešením soustavy. Budeme sledovat jednotlivá přiblížení po každé iteraci. Spočítáme si Euklidovskou normu $\|\,.\,\|_E$ a normu $\|x\|_\infty$ rozdílů přesného a přibližného řešení. Matice soustav lineárních algebraických rovnic jsou voleny tak, že je podle Věty 4 pozitivně definitní, protože je symetrická a ostře diagonálně dominantní. Normy $\|r_k\|_E$, $\|r_k\|_\infty$, $\|x_k - x_t\|_E$ a $\|x_k - x_t\|_\infty$ při zvětšujícím se počtu kroků se budou neustále zmenšovat, což uvidíme i v následujících úlohách, kde jsou zadány soustavy vyšších řádů.

V první části šesté kapitoly uvádíme příklady, kdy známe přesné řešení a počítáme přibližná řešení užitím MSG a sledujeme jejich konvergenci k přesnému řešení.

V druhé části numericky řešíme obyčejnou diferenciální rovnici druhého řádu s okrajovými podmínkami užitím diferenčního schématu a MSG. Ukážeme si, jak se pro tři konkrétní body přibližné řešení postupně zpřesňuje. Chyba přibližného řešení ve vybraných bodech intervalu $< 0,1 >$ je způsobena nahrazením druhé derivace diferencí a zaokrouhlovacími chybami při užití MSG. To budeme demonstrovat ve výsledném grafu některých dělení daného intervalu a samozřejmě i v přiřazených tabulkách.

6.1. POČETNÍ ÚLOHY ŘEŠENÉ MSG

ÚLOHA ČÍSLO 1.

Př.: Řešme danou soustavu lineárních algebraických rovnic pro $n = 3$.

Podmínka pro ukončení programu $\|\boldsymbol{r_k}\|_{\boldsymbol{E}} < 0{,}01$.

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 0 \\ 1 & 5 & 1 \\ 0 & 1 & 5 \end{pmatrix} \;;\quad x_t = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \;;\quad b = \begin{pmatrix} 8 \\ -7 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Počáteční aproximace řešení soustavy je zvolena $x_0 = (0, 0, 0)^T$.

Číslo iterace (k)	**Přibližné řešení (x_k)**	$\|\boldsymbol{r_k}\|_{\boldsymbol{E}}$	$\|\boldsymbol{r_k}\|_\infty$	$\|\boldsymbol{x_k} - \boldsymbol{x_t}\|_{\boldsymbol{E}}$	$\|\boldsymbol{x_k} - \boldsymbol{x_t}\|_\infty$
1	$\begin{pmatrix} 2{,}140350 \\ -1{,}872807 \\ 0{,}802631 \end{pmatrix}$	1,327151	0,859649	0,273552	0,197368
2	$\begin{pmatrix} 1{,}997082 \\ -2{,}009359 \\ 0{,}983955 \end{pmatrix}$	0,113678	0,089581	0,018802	0,016044
3	$\begin{pmatrix} 2{,}000122 \\ -1{,}999486 \\ 0{,}999585 \end{pmatrix}$	0,002978	0,002273	0,000671	0,000513

ÚLOHA ČÍSLO 2.

Př.: Řešme danou soustavu lineárních algebraických rovnic pro $n = 5$.

Podmínka pro ukončení programu $\|\boldsymbol{r_k}\|_E < 0{,}01$.

$$A = \begin{pmatrix} 12 & 1 & 0 & 2 & 5 \\ 1 & 12 & 3 & 2 & 4 \\ 0 & 3 & 12 & 6 & 0 \\ 2 & 2 & 6 & 12 & 1 \\ 5 & 4 & 0 & 1 & 12 \end{pmatrix} \; ; \; x_t = \begin{pmatrix} 7 \\ -4 \\ 8 \\ 5 \\ -5 \end{pmatrix} \; ; \; b = \begin{pmatrix} 65 \\ -27 \\ 114 \\ 109 \\ -36 \end{pmatrix}$$

Počáteční aproximace řešené soustavy je zvolena $x_0 = (0, 0, 0, 0, 0)^T$.

Číslo iterace (k)	**Přibližné řešení ($\boldsymbol{x_k}$)**
1	$(4{,}097698 ; -1{,}702120 ; 7{,}186732 ; 6{,}871525 ; -2{,}269494)^T$
2	$(5{,}476472 ; -4{,}269610 ; 7{,}330201 ; 6{,}285135 ; -4{,}397392)^T$
3	$(6{,}978577 ; -4{,}426314; 7{,}464733 ; 5{,}350698 ; -4{,}659796)^T$
4	$(7{,}142694 ; -4{,}093854 ; 7{,}926124 ; 5{,}131268 ; -4{,}915315)^T$
5	$(7{,}013639 ; -4{,}011413 ; 8{,}010686 ; 5{,}017126 ; -5{,}045297)^T$
6	$(7{,}010727 ; -3{,}991195 ; 8{,}000722 ; 4{,}996165 ; -5{,}015959)^T$
7	$(7{,}002745 ; -3{,}996608 ; 7{,}997956; 4{,}997124 ; -4{,}996880)^T$
8	$(6{,}998023 ; -4{,}000590 ; 7{,}999235 ; 4{,}999273 ; -4{,}996141)^T$

Číslo iterace (k)	$\|\boldsymbol{r_k}\|_E$	$\|\boldsymbol{r_k}\|_\infty$	$\|\boldsymbol{x_k} - \boldsymbol{x_t}\|_E$	$\|\boldsymbol{x_k} - \boldsymbol{x_t}\|_\infty$
1	53,710003	36,897517	5,032223	2,902301
2	15,607209	12,968635	2,203897	1,523527
3	7,953955	5,597959	0,841095	0,535266
4	3,123167	2,304439	0,242962	0,142694
5	0,635069	0,503904	0,052684	0,045297
6	0,128648	0,106488	0,021506	0,015959
7	0,099412	0,061857	0,006420	0,003391

ÚLOHA ČÍSLO 3.

Př.: Řešme danou soustavu lineárních algebraických rovnic pro $n = 10$.

$$A = \begin{pmatrix} 17 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 17 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 17 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 17 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 2 & 0 & 17 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 17 & 0 & 2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 17 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 17 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 17 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 0 & 17 \end{pmatrix} \; ; \; x_t = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 4 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \\ 3 \\ 0 \\ 7 \\ -9 \end{pmatrix} \; ; \; b = \begin{pmatrix} 19 \\ -18 \\ 75 \\ -22 \\ 28 \\ 46 \\ 34 \\ -13 \\ 128 \\ -144 \end{pmatrix}.$$

Počáteční aproximace řešení soustavy je zvolena $x_0 = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$.

Podmínka pro ukončení programu $\|\boldsymbol{r_k}\|_{\boldsymbol{E}} < 0{,}001$.

Číslo iterace **(k)**	**Přibližné řešení** **($\boldsymbol{x_k}$)**
1	(1,050395 ; -0,995111 ; 4,146296 ; -1,216246 ; 1,547950 ; 2,543061 ; 1,879654 ; -0,718691 ; 7,076346 ; -7,960889)^T
2	(0,882469 ; -1,211838 ; 3,796391 ; -2,003192 ; 1,296677 ; 1,081677 ; 2,636134 ; -0,432428 ; 7,076141 ; -8,927860)^T
3	(1,014559 ; -1,065180 ; 3,941854 ; -1,954784 ; 1,160651 ; 0,968530 ; 3,002965 ; -0,044464 ; 7,027667 ; -8,953813)^T
4	(1,009813 ; -1,019369 ; 3,999642 ; -1,989072 ; 1,007958 ; 0,996928 ; 2,992233 ; 0,004732 ; 6,999950 ; -8,999393)^T

Číslo iterace **(k)**	**Přibližné řešení** $\boldsymbol{x}_{(k)}$
5	(0,997304 ; -1,000728 ; 3,999573 ; -1,998955 ; 1,000112 ; 0,998895 ; 2,997103 ; -0,000452 ; 7,000974 ; -9,000115)^T
6	(0,999259 ; -0,999760 ; 4,000387 ; -1,999055 ; 1,000351 ; 0,999770 ; 2,999517 ; -0,000070 ; 7,000612 ; -8,999533)^T

Číslo iterace **(k)**	$\lVert \boldsymbol{r}_k \rVert_E$	$\lVert \boldsymbol{r}_k \rVert_\infty$	$\lVert \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_t \rVert_E$	$\lVert \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_t \rVert_\infty$
1	37,216143	27,030102	2,485316	1,543061
2	9,738885	6,153626	0,724733	0,432428
3	2,850683	2,291789	0,203886	0,160651
4	0,406602	0,283542	0,027328	0,019369
5	0,069413	0,044274	0,004456	0,002896
6	0,021708	0,012401	0,001629	0,000944

ÚLOHA ČÍSLO 4.

Př.: Řešme danou soustavu lineárních algebraických rovnic pro $n = 20$.

$$A = \begin{pmatrix}
23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 & 3 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -6 & 0 & 23
\end{pmatrix}$$

$x_t = (2,2,-3,5,-7,-1,1,0,1,8,1,2,2,6,3,-5,2,1,-5)^T$

b= (88, 4, -33, 104, -120, -13, 35, 11, -33, 12,

192, 22, -24, 29, 159, 54, -166, 77, 63, -133)^T

Počáteční aproximace řešení soustavy je zvolena

$x_0 = (0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0)$.

Podmínka pro ukončení programu $\|r_k\|_E < 0{,}001$.

Číslo iterace (k)	**Přibližné řešení** $\boldsymbol{x}_{(k)}$
1	(2,977835 ; 0,135356 ; -1,116688 ; 3,519259 ; -4,060684 ; -0,439907 ; 1,184366 0,372229 ; -1,116688 ; 0,406068 ; 6,497095 ; 0,744458 ; -0,812136 ; 0,981332 ; 5,380406 ; 1,827308 ; -5,617280 ; 2,605605 ; 2,131859 ; -4,500591)^T
2	(3,033580 ; 1,406500 ; -1,799599 ; 4,242512 ; -6,025316 ; 0,452223 ; -0,168892 0,310032 ; 0,328308 ; 0,799987 ; 7,799374 ; 0,877753 ; 1,768949 ; 1,994563 ; 5,459102 ; 3,339884 ; -5,325410 ; 2,173389 ; 1,182367 ; -5,095657)^T
3	(2,330914 ; 1,864211 ; -2,558609 ; 4,580203 ; -6,517630 ; 0,516820 ; -0,733374 0,773330 ; 0,364086 ; 0,676365 ; 8,364226 ; 0,973030 ; 2,025408 ; 2,237461; 5,901186 ; 3,136076 ; -5,016371 ; 2,103035 ; 0,716315 ; -4,919448)^T
4	(2,015126 ; 1,916808 ; -2,890287 ; 4,820255 ; -6,877426 ; 0,733552 ; -0,815094 0,781742 ; 0,250344 ; 0,856744 ; 8,264840 ; 0,952140 ; 2,148395 ; 2,041691 ; 6,089037 ; 3,086390 ; -5,070371 ; 2,048732 ; 0,864840 ; -4,931848)^T
5	(1,977434 ; 1,950039 ; -3,057793 ; 4,979472 ; -7,000714 ; 0,975951 ; -0,915596 0,887262 ; 0,070447 ; 0,962873 ; 7,996099 ; 0,906009 ; 2,107521 ; 1,894596 ; 6,038511 ; 2,970382 ; -5,009982 ; 1,997412 ; 1,075753 ; -5,021421)^T
6	(1,975448 ; 1,996914 ; -3,065737 ; 5,020888 ; -7,012748 ; 1,037341 ; -0,988273 0,992476 ; -0,010533 ; 0,961206 ; 7,965928 ; 0,928348 ; 2,030017 ; 1,909038 ; 6,024159 ; 2,917346 ; -4,948614 ; 1,971814 ; 1,079983 ; -5,029604)^T
7	(1,984186 ; 2,035640 ; -3,004372 ; 5,029747 ; -7,014428 ; 1,038157 ; -1,037497 1,053721 ; -0,037643 ; 0,974648 ; 8,001019 ; 0,985962 ; 1,977805 ; 1,974301 ; 6,028910 ; 2,937018 ; -4,932265 ; 1,956317 ; 1,016120 ; -5,010273)^T
8	(1,999266 ; 2,040865 ; -2,969710 ; 5,034386 ; -7,022078 ; 1,031244 ; -1,051404 1,054510 ; -0,034682 ; 1,018151 ; 8,001977 ; 1,024033 ; 1,975607 ; 2,013796 ; 6,023692 ; 2,985957 ; 4,962671 ; 1,962070 ; 0,984239 ; -5,004664)^T

Číslo iterace (k)	Přibližné řešení $x_{(k)}$
9	(2,014651 ; 2,019617 ; -2,974984 ; 5,031200 ; -7,026348 ; 1,018754 ; -1,038614 1,022052 ; -0,017836 ; 1,065679 ; 7,978026 ; 1,041101 ; 1,997341 ; 2,032486 ; 6,003269 ; 3,038636 ; -5,019169 ; 1,991601 ; 0,981427 ; -5,009302)^T
10	(2,010811 ; 1,996869 ; -3,010306 ; 5,009941 ; -7,013504 ; 1,003002 ; -1,016741 1,008118 ; -0,011321 ; 1,054111 ; 7,974398 ; 1,036944 ; 1,993541 ; 2,038306 ; 5,977078 ; 3,044832 ; -5,043560 ; 2,026294 ; 0,985965 ; -5,004717)^T
11	(1,994512 ; 1,986960 ; -3,028215 ; 4,986137 ; -7,000199 ; 0,995066 ; -0,999926 1,009141 ; -0,011427 ; 1,012933 ; 7,991210 ; 1,027435 ; 1,974676 ; 2,035738 ; 5,960598 ; 3,028158 ; -5,035141 ; 2,039676 ; 0,984847 ; -4,987914)^T
12	(1,983333 ; 1,990547 ; -3,007942 ; 4,981372 ; -6,998960 ; 1,000826 ; -0,991861 1,002642 ; -0,005410 ; 0,985746 ; 8,006494 ; 1,013620 ; 1,972969 ; 2,016423 ; 5,967427 ; 3,013480 ; -5,012653 ; 2,020330 ; 0,986755 ; -4,973535)^T
13	(1,989651 ; 1,996917 ; -2,986534 ; 4,993744 ; -6,997343 ; 1,003553 ; -0,989539 0,990210 ; 0,006215 ; 0,981742 ; 8,009477 ; 0,995009 ; 1,991210 ; 1,992679 ; 5,989543 ; 3,001754 ; -4,998242 ; 1,998618 ; 0,996688 ; -4,978765)^T
14	(2,004954 ; 2,001151 ; -2,986728 ; 5,006123 ; -6,991714 ; 0,997274 ; -0,992256 0,986753 ; 0,012154 ; 0,990395 ; 8,004972 ; 0,983481 ; 2,009429 ; 1,983606 ; 6,008971 ; 2,992876 ; -4,995917 ; 1,993595 ; 1,005367 ; -4,998473)^T
15	(2,007944 ; 2,002441 ; -2,996297 ; 5,002108 ; -6,990754 ; 0,992531 ; -0,995067 0,994310 ; 0,007634 ; 0,992362 ; 8,004370 ; 0,986191 ; 2,010948 ; 1,989287 ; 6,012720 ; 2,988874 ; -4,993227 ; 1,995869 ; 1,004676 ; -5,008781)^T
16	(2,003179 ; 2,000753 ; -3,001246 ; 4,994325 ; -6,996515 ; 0,994001 ; -0,996686 0,999517 ; 0,002061 ; 0,994055 ; 8,003452 ; 0,994008 ; 2,007867 ; 1,995492 ; 6,009726 ; 2,991195 ; -4,990994 ; 1,994762 ; 1,002776 ; -5,009335)^T

Číslo iterace (k)	Přibližné řešení (x_k)
17	(1,998053 ; 1,997445 ; -3,000693 ; 4,992930 ; -7,002708 ; 0,998706 ; -0,997933 0,999096 ; 0,000152 ; 0,997701 ; 8,001259 ; 1,000038 ; 2,004108 ; 1,998209 ; 6,004607 ; 2,997063 ; -4,993430 ; 1,993376 ; 1,002510 ; -5,003355)^T
18	(1,997944 ; 1,996629 ; -3,000916 ; 4,998029 ; -7,002748 ; 1,000501 ; -1,000259 0,999021 ; 0,000151 ; 1,001061 ; 7,999776 ; 1,001772 ; 2,000519 ; 2,000126 ; 6,001032 ; 3,000116 ; -4,998793 ; 1,996966 ; 1,002048 ; -4,999283)^T
19	(1,999516 ; 1,998800 ; -3,001403 ; 5,001251 ; -7,000417 ; 1,000249 ; -1,001471 1,000461 ; -0,000270 ; 1,001673 ; 7,999657 ; 1,001329 ; 1,998820 ; 2,001243 ; 5,999351 ; 3,000367 ; -5,001297 ; 2,000900 ; 1,000435 ; -4,999007)^T

Číslo iterace (k)	$\|\boldsymbol{r}_k\|_E$	$\|\boldsymbol{r}_k\|_\infty$	$\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_t\|_E$	$\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_t\|_\infty$
1	102,735023	56,841460	6,554231	2,939315
2	30,998629	13,896843	2,587468	1,200400
3	16,101279	5,977823	1,281194	0,483179
4	6,582611	3,311309	0,666599	0,266447
5	5,286601	2,252317	0,271486	0,112737
6	2,758080	1,234015	0,205744	0,090961
7	2,776738	1,196024	0,153152	0,067734
8	2,448208	0,926895	0,132695	0,054510
9	1,838946	0,994665	0,124344	0,065679
10	1,656844	0,896651	0,113131	0,054111

Číslo iterace (k)	$\lVert \boldsymbol{r}_k \rVert_E$	$\lVert \boldsymbol{r}_k \rVert_\infty$	$\lVert \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_t \rVert_E$	$\lVert \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_t \rVert_\infty$
11	1,148307	0,627533	0,099362	0,039676
12	1,208239	0,494127	0,070743	0,032572
13	0,971546	0,493182	0,041938	0,021234
14	0,490327	0,210542	0,040820	0,016518
15	0,427160	0,163566	0,035968	0,013808
16	0,331422	0,158776	0,025473	0,009726
17	0,235715	0,136831	0,015372	0,007069
18	0,165965	0,072489	0,007085	0,003370
19	0,076131	0,035359	0,004443	0,001673

6.2. ŘEŠENÍ OBYČEJNÉ DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE 2. ŘÁDU

V tomto odstavci se zaměříme na numerické řešení obyčejné diferenciální rovnice 2 řádu

(6.1) $$-y'' + y = 10(\pi^2 + 1)\sin(\pi x)$$

na intervalu $< 0,1 >$ s okrajovými podmínkami $y(0) = y(1) = 0$.

Existence a jednoznačnost uvedené úlohy je řešena v [3, str. 225 - 226]. Úloha byla volena tak, že její přesné řešení je funkce

(6.2) $$y = 10\ \sin(\pi x).$$

Úlohu budeme řešit nahrazením druhé derivace diferencí. Po diskretizaci úlohy obdržíme příklad vedoucí na soustavu lineárních algebraických rovnic s pozitivně definitní symetrickou a pásovou maticí. Soustavu budeme řešit MSG. Při diskretizaci budeme postupovat následujícím způsobem.

Řešení y $\in C^4 < 0,1 >$. Vyjádřeme Taylorův rozvoj v bodech $y(x_i + h)$ a v $y(x_i - h)$ tak, že

$$y(x_i + h) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{6}y''' + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(x_i + \tau^+ h),$$

kde $0 < \tau^+ < 1$

$$y(x_i - h) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^3}{6}y''' + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(x_i + \tau^- h)$$

$$0 < \tau^- < 1$$

Sečtením výše uvedených rovnic obdržíme

$$\frac{y(x_i - h) - 2y(x_i) + y(x_i + h)}{h^2} =$$

$$= y''(x_i) + \frac{1}{h^2}\left\{\frac{h^4}{24}\left[y^{(4)}(x_i + \tau^+ h) + y^{(4)}(x_i + \tau^- h)\right]\right\} =$$

$$= y''(x_i) + \tfrac{h^2}{24}[y^{(4)}(x_i + \tau^+ h) + \left(y^{(4)} + \tau^- h\right)].$$

Nyní můžeme zvolit $n > 1, n \in N$. Definujeme si body x_j na $< 0,1 >$ následujícím způsobem:

$$x_i = 0 + \frac{1-0}{n+1} = i.h \ ,$$

pro $i = 0, 1, \dots, n+1$, kde

$$h = \frac{1}{n+1} \ .$$

Do rovnice (6.1) tedy dosadíme aproximaci druhé derivace v bodě x_i:

$$\frac{2y(x_i) - y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{h^2} + y(x_i) = f(x_i) + O(h^2)$$

$$2Y_i - Y_{i+1} - Y_{i-1} + Y_i h^2 = f(x_i).h^2$$

Vzniklá soustava lineárních algebraických rovnic vypadá následovně:

$$\begin{aligned}
(2+h^2)Y_1 - Y_2 \qquad\qquad\qquad &= f(x_1).h^2 \\
(2+h^2)Y_2 - Y_3 \qquad\qquad &= f(x_2).h^2 \\
\ddots \qquad\qquad &\ \ \vdots \\
(2+h^2)Y_{n-1} - Y_{n-2} &= f(x_{n-1}).h^2 \\
(2+h^2)Y_n - Y_{n-1} &= f(x_n).h^2
\end{aligned} \tag{6.3}$$

Budeme tedy řešit SLAR:

$$AY = b,$$

kde

$$A = \begin{pmatrix} 2+h^2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2+h^2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2+h^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2+h^2 \end{pmatrix},$$

$Y = (Y_1, \dots, Y_n)^T$, $b = \left(f(x_1), \dots, f(x_n)\right)^T$

A je pozitivně definitní (ostře diagonálně dominantní), symetrická, třídiagonální matice.

Daný interval $< 0,1 >$ postupně ekvidistantně rozdělíme při počtu vnitřních bodů $n = 3, n = 7$ a $n = 15$.

Vytvoříme si tabulku hodnot aproximací. V další tabulce pak zhodnotíme výsledky pro jednotlivá rozdělení intervalu.

Popíšeme si řešení při rozdělení intervalu na tři vnitřní body.

$$n = 3, \qquad h = \frac{1}{n+1} = \frac{1}{4}$$

První rovnici sestavíme následovně:

$$2Y_1 - Y_2 + Y_1 h^2 = 10(\pi^2 + 1)\sin(\pi x_1)$$

Po úpravě získáváme

$$(2 + h^2)Y_1 - Y_2 = 10(\pi^2 + 1)\sin(\pi h)$$

Tvar soustavy (6.3) bude

$$(2+h^2)Y_1 - Y_2 = 10(\pi^2+1)\sin(\pi h)\,h^2\,,$$

$$-Y_1 + (2+h^2)Y_2 - Y_3 = 10(\pi^2+1)\sin(2\pi h)\,h^2\,,$$

$$-Y_2 + (2+h^2)Y_3 = 10(\pi^2+1)\sin(3\pi h)\,h^2\,,$$

což maticově lze přepsat na tvar

$$\begin{pmatrix} 2+h^2 & -1 & 0 \\ -1 & 2+h^2 & -1 \\ 0 & -1 & 2+h^2 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10(\pi^2+1)\sin(1\pi h)\,h^2 \\ 10(\pi^2+1)\sin(2\pi h)\,h^2 \\ 10(\pi^2+1)\sin(3\pi h)\,h^2 \end{pmatrix}$$

Označme $Y_i = Y(x_i)$ a rovnice získá tvar

$$\begin{pmatrix} \frac{33}{16} & -1 & 0 \\ -1 & \frac{33}{16} & -1 \\ 0 & -1 & \frac{33}{16} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4{,}803731 \\ 6{,}793502 \\ 4{,}803731 \end{pmatrix} .$$

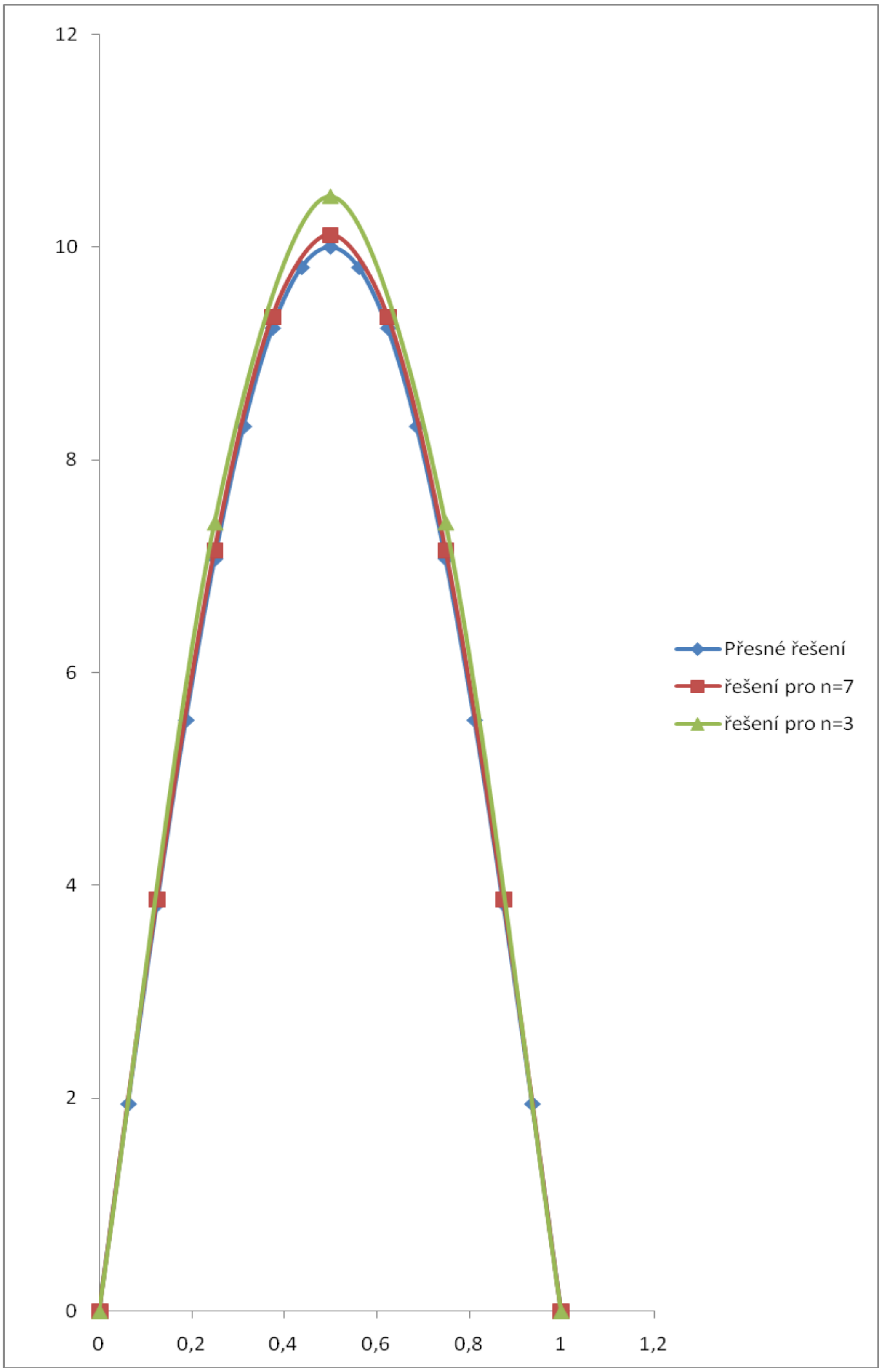
Analogicky takto vytvoříme maticový zápis soustavy rovnic při počtu vnitřních uzlů $n = 7$ a $n = 15$. Takto vytvořené matice soustav zapíšeme do programu a vypočtené výsledky vyhodnotíme v následujících tabulkách.

Grafické znázornění řešení je zakresleno v Grafu 1. Modré vykreslení znázorňuje přesné řešení. Zelenou barvou jsou zaznamenány výsledky grafu, když jsme interval rozdělili na 3 vnitřní uzly. Červeně je zakreslen graf při 7 vnitřních uzlech. Graf pro 15 vnitřních uzlů zakreslen není. Přiblížil se natolik k přesnému řešení, že tyto dva grafy splývají v jeden jediný. I to je bráno jako důkaz výše uvedených poznatků, že se při jemnějším dělení intervalu výsledky zpřesňují.

n	3	7	15	Přesné řešení $y(x_i)$
h	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	
x_i	$x_i,\ 1 \leq i \leq n$ Přibližné řešení $Y(x_i)$			
$\frac{1}{16}$			1,956600	1,950903
$\frac{2}{16}$		3,871779	3,838009	3,826834
$\frac{3}{16}$			5,571925	5,555702
$\frac{4}{16}$	7,409889	7,154115	7,091716	7,071067
$\frac{5}{16}$			8,338976	8,314696
$\frac{6}{16}$		9,347303	9,265774	9,238795
$\frac{7}{16}$			9,836494	9,807852
$\frac{8}{16}$	10,479167	10,117448	10,029203	10
$\frac{9}{16}$			9,836494	9,807852
$\frac{10}{16}$		9,347303	9,265774	9,238795
$\frac{11}{16}$			8,338976	8,314696
$\frac{12}{16}$	7,409889	7,154115	7,091716	7,071067
$\frac{13}{16}$			5,571925	5,555702
$\frac{14}{16}$		3,871779	3,838009	3,826834
$\frac{15}{16}$			1,956600	1,950903

n	3	7	15
h	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$
$Y\left(\frac{1}{4}\right)$	7,409889	7,154115	7,091716
$\left\lvert Y\left(\frac{1}{4}\right) - y\left(\frac{1}{4}\right)\right\rvert$	0,338822	0,083048	0,020649
$Y\left(\frac{1}{8}\right)$	10,479167	10,117448	10,029203
$\left\lvert Y\left(\frac{1}{8}\right) - y\left(\frac{1}{8}\right)\right\rvert$	0,479167	0,117448	0,029203
$Y\left(\frac{1}{16}\right)$	7,409889	7,154115	7,091716
$\left\lvert Y\left(\frac{1}{16}\right) - y\left(\frac{1}{16}\right)\right\rvert$	0,338822	0,083048	0,020649

Připomeňme, že $Y(x_i)$ označuje přibližné řešení a $y(x_i)$ přesné řešení rovnice (6.1) v bodě x_i.



Graf č. 1 – Přesné a přibližná řešení rovnice (6.1) ve vybraných uzlech

7. ZÁVĚR

Diplomová práce je zaměřená na metody řešení SLAR. Soustavy se řeší metodami na různé úrovni obtížnosti. Ty lehčí úlohy se vyučují již na základních školách, obtížnější na středních školách. Ovšem i na některých středních školách se setkáme s důkladnějším probíráním problematiky.

Úvodní kapitola je zaměřena na celkový přehled vývoje metod řešení SLAR. V diplomové práci jsou uvedeny postupně základní typy metod, kterými lze soustavy řešit. Tyto metody jsme demonstrovali na konkrétních úlohách. Pomocí naprogramované metody sdružených gradientů napomáháme k přiblížení dané problematiky a realizaci z hlediska výpočetní techniky. Dokážeme tím vzbudit větší zájem u nadaných studentů. Využití nalezneme i pro ostatní studenty z důvodu usnadnění pochopení výpočtů. Pro lepší orientaci jsou zpracovány tabulky, ze kterých je zřetelné, jakým způsobem tato metoda konverguje. Graficky jsou znázorněny výpočty daného příkladu.

Cílem diplomové práce bylo ucelené poskytnutí informací o možnostech řešení SLAR. Následně jsme se podrobněji zaměřili na MSG. Zde výše zmiňovaný program napomáhá lepšímu pochopení této metody a propojení s dalšími tématy. Toho mohou využít například žáci, kteří pokračují ve svém studiu i po střední škole.

8. Použitá literatura

[1] Rektorys, K. a spol,: *Přehled užité matematiky 1*, PROMETHEUS, Praha, 2000.

[2] Struik, Dirk, J.: *Dějiny matematiky,* ORBIS, Praha, 1963.

[3] Vitásek, E.: *Numerické metody,* SNTL, Praha, 1987.

[4] Ralston, A.: *Základy numerické matematiky,* ACADEMIA, Praha, 1978.

[5] Brandts, J., Křížek, M.: *Padesát let metody sdružených gradientů*, Pokroky matematiky fyziky a astronomie (2), ročník 47/2002.

[6] Mlýnek, J.: *Užití metody bikonjugovaných gradient v komplexním oboru*, Sborník konference Matematika na vysokých školách, Herbertov, 2009.

9. PŘÍLOHA – VÝPIS PROGRAMU

```
% Program pro konkrétní řešení úlohy číslo 2
% Zadání matice A, počáteční aproximace xk, vektorů b a x
A=[12 1 0 2 5;1 12 3 2 4;0 3 12 6 0;2 2 6 12 1;5 4 0 1 12];
xk=[0;0;0;0;0];
b=[65;-27;114;109;-36];
x=[7;-4;8;5;-5];

% Nadefinování základních vztahů (5.54)
rk=b;
pk=rk;
i=0;
ch=1.0;

% Použijeme cyklus while pro opakování celého algoritmu
% (5.55) až (5.59)
% Cyklus se bude opakovat dokud chyba ch bude větší nebo
% rovno 0,01.
while ch>=0.01
i=i+1;

% Format long nám vypíše výsledky na více desetinných míst
format long;

% Provádíme výpočty jednotlivé výpočty algoritmu (5.55) až
% (5.59)
alfa_citatelk=rk'*rk;
alfa_menovatelk=rk'*(A*rk);
alfak=(alfa_citatelk)/(alfa_menovatelk);
xk1=xk+alfak*pk;
rk1=rk-alfak*(A*pk);

% Funkcí disp vypíšeme na obrazovku čísla jednotlivých
% iterací a výstupy vektorů xk, pk, rk.
disp('iterace cislo');
disp(i);
disp('vektor xk1');
```

```
disp(xk1);
disp('vektor rk1');
disp(rk1);
betak=(rk1'*rk1)/(rk'*rk);
pk1=rk1+betak*pk;
disp('vektor pk1');
disp(pk1);
ch=rk1.*rk1;
ch=sqrt(ch);

% Počítáme euklidovskou normu rk
absolutni_hodnotark=abs(rk1);
mocninark=(absolutni_hodnotark).*(absolutni_hodnotark);
soucetrk=sum(mocninark);
euklidovska_norma_rk=sqrt(soucetrk);
disp ('euklidovska norma rk');
disp (euklidovska_norma_rk);

% Počítáme maximální normu rk
maximalni_normark=max(absolutni_hodnotark);
disp ('maximalni norma rk');
disp (maximalni_normark)

% Počítáme euklidovskou normu xk
rozdil=xk1-x;
absulutni_hodnotaxk=abs(rozdil);
mocninaxk=absulutni_hodnotaxk.*absulutni_hodnotaxk;
soucetxk=sum(mocninaxk);
euklidovska_norma_xk=sqrt(soucetxk);
disp ('euklidovska norma xk');
disp (euklidovska_norma_xk);

% Počítáme maximální normu xk
maximalni_normaxk=max(absulutni_hodnotaxk);
disp ('maximalni norma xk');
disp (maximalni_normaxk);
```

```
% Zde nadefinujeme pro další iteraci nové hodnoty, se
% kterými program bude pracovat a ukončíme cyklus while.
xk=xk1;
rk=rk1;
pk=pk1;
end
```